福井大学
工学部　研究報告
第43巻　第２号
1995年９月

磁気異方性効果の研究(第１報)
－極限収斂操作を加味したシンプソン変法による完全楕円積分の近似計算－

高橋　一朗*

Studies on the Diamagnetic Effects (Part 1)
– Approximate Calculation of Complete Elliptic Integrals Based on a Modified Simpson Method Mediated by Limit Convergence Treatments –

Ichiro TAKAHASHI

(Received, Aug. 25, 1995)

New strategy and tactics to calculations of complete elliptic integrals E and K are established for the ease in studying on diamagnetic effects. With use of BASIC programs ESZ1600 and KSZ1600 (reflecting new methods), technical errors out of personal computer calculations are estimated as less than 10^{-5}.

１．緒言

生体内で日夜営まれる酵素（enzyme）反応は，一般に，pH～７の水溶液中，常温で，低い濃度で多くの成分が共存しているという条件の下で行われるにもかかわらず，大量の基質（substrate）を触媒的に速やかに変換して目的物を与える。反応結果は通常，基質特異的・位置特異的・立体特異的である。こうした機能の発現のためには，反応に先立って，定まった構造の基質取り込み場及び反応場を有する酵素即ちホスト（Host）が，非共有結合的な力に基づいて，フィットする構造の基質即ちゲスト（guest）を取り込んで，特定の形をした錯体を形成してから反応が進行することが重要と考えられている。

「ホスト・ゲストの化学」で知られる包接化合物の化学は，分子間相互作用を以上のような観点から捉えようとするものであるが，以前は比較的特殊な研究領域であった。普遍性を獲得したのは，１９７０年代に入ってBiomimetic chemistryの概念が広まり，これに伴って，人工的に構築されたホスト化合物が生体内のレセプターモデルとして注目されるようになってからのことである。換言すれば，共通項として「生体反応に対する相当強力な思い入れ」を持った反応化学者の急激な増加が，「ホスト・ゲストの化学」領域を生み出したことになる訳であるが，研究者の出自の専門によって目標の据え方が

*生物化学工学科

異なって来るのは当然である。筆者の専門とする有機合成化学の立場からは，酵素をはじめとする天然ホスト（通常，巨大分子）の機能の一部もしくは全部を，より効率的に実現出来る反応系（或いは中心となる低分子化合物）を創り出すことが目標となる。

ホストによるゲスト取り込みによって生成する錯化合物，即ち，ホスト・ゲスト包接錯体を研究する際，「包接」を直接証明出来るのは，今の所，包接結晶のＸ線回折・中性子線回折法だけである。しかしながら，包接結晶は常時得られるとは限らないので，（溶液中での）間接証明法の総合結果として包接の事実を確認する，というのが通常とられる手続きである。こうした状況証拠を固める上で，蛍光光度法と並び，最も頻用されているのが，核磁気共鳴（ＮＭＲ）法であり，いずれの方法でも，ホストとゲストの濃度を変化させてtitration 実験を行うことにより，相互作用の強さを直接反映する解離定数（K_d），もしくは安定度定数（$K_s = 1/K_d$）を決定することが出来るので重宝されている。しかも，ＮＭＲ法の場合には，π−電子系の周囲の磁気異方性効果の大きさを半定量的に取り扱うことが理論的に可能なので，一層興味がある。何故なら，このことは，溶液中でのホスト・ゲスト包接錯体の形状を具体的に求めることに道を拓くことになるからである（1，2）。

以上の考察に基づいて筆者は，先に報告したジフェニルメタン骨格を有するシクロファン系ホスト化合物（ベンゼン環を含む）と疎水性ゲスト分子との間の錯体の形を一義的に決定することを最終目標とする研究に着手することにした。この種の理論計算に最も良く用いられるベンゼン環まわりの磁気異方性の近似式，Johnson-Bovey 式（3）には，円筒座標を用いる関係もあって完全楕円積分が２種類とも（EとK）含まれており，これらをどのように取り扱うかが後続の検討の正否に直結することになる。一方，楕円積分は，磁気異方性という命題を離れても工学的に重要な位置を占めるものであり，この機会に２種類ともについて信頼性が高くかつ手軽な計算法が確立されるならば，意義があると考えた。本論文で筆者は，簡便かつ誤差の少ない，完全楕円積分の近似計算法を見出したので報告する。

2．結果と考察

完全楕円積分E及びKは，$0 \le k^2 \le 1$なる定数k^2を含み，式［1］・［2］のように定義される（4）。そして，積分区間に母関数の分母がゼロになる地点（$t = 1$）を含んでいるにもかかわらず，完全楕円積分Kで$k^2 = 1$の時を除き定積分が存在する，というユニークな性質がある。

$$E(k) = \int_0^1 \sqrt{\frac{1 - k^2 t^2}{1 - t^2}}\, dt \qquad [1]$$

$$K(k) = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{(1 - t^2)(1 - k^2 t^2)}}\, dt \qquad [2]$$

通常，ある関数の定積分の実用的な近似値を求めるには，関数を級数展開したものの項別積分を行った和をとるのが定石であり，実際，市販の数値表はそうして製作されている（5）。この点，楕円積分も例外ではない（6）。しかしながら，この場合には，

k^2が０か１に近い場合を除くと各項の形がかなり複雑となることに加え，収斂が早くないので多数の積分項を計算する必要があり，項別積分がベストの方法であるとは必ずしも断定出来ない。そこで筆者はまず，楕円関数そのものに対して単純にシンプソン（Simpson）法を適用して定積分の近似計算を行った場合にどのような結果になるか，という基本的な所から検討を開始した。

シンプソン法は，関数の定積分（式［３］）の実用的な近似値を得る最も代表的な方法である。即ち，

$$y = \int_a^b f(x)\,dx \quad [3]$$

に対して区間（a，b）を２N等分すると，刻み幅hは（$b-a$）／２Nで表される。ここで，$x=a$，$a+h$，…，$a+2Nh$でのyの値を各々y_0，y_1，…，y_{2N}とすると，次の式［４］が成り立つ。

$$y = (h/3)\,[\,(y_0 + y_{2N}) + 4\,(y_1 + y_3 + \cdots + y_{2N-1}) + 2\,(y_2 + y_4 + \cdots + y_{2N-2})] - \frac{N\,(2h)^5}{2880} f^{(4)}(\xi) \quad [4]$$

最後の剰余項は，Nの増加と共に加速度的に減少するので，Nをある程度大きくとれば，精度的に無視出来るようになり，有効な近似値が得られる。もちろん，$f(x)$がxの３次以下であれば剰余項は常時０であるから，正確な定積分を与える（7，8）。

さて，完全楕円積分をシンプソン法により近似計算する場合の積分区間は０（＝a）から１（＝b）の間であるが，E，K共，式［４］通りまともに計算を行ったのでは発散してしまう。理由は，y_{2N}が無限大になるからである。そこでやむを得ず，式［４］からy_{2N}のみをカットした形で検討を進めることにした。y_{2N-2}とy_{2N-1}をカットせず温存したのは，なるべく特異点に近い所まで楕円積分の特徴を捉えようとしたからである。いずれにせよ，楕円積分の母関数が一様で滑らか（要するに，シンプソン向き）にしても，Nをかなり大きくしないと近似計算値が真値に接近しないことが，この段階で明らかとなった。

次いで，最も手軽なプログラム言語であるBASICで計算プログラムを組み，近似計算を行ってみた。周知の通り，BASICには使用可能なdimensionに厳しい制限がある。具体的には，エラーにならない最大の区間分割数は，86BASIC（ＮＥＣ）で$N=2^{13}-1=8191$，VIP-BASIC（Mainstay-McIntosh）で$N=2^{14}-1=16383$であった。この，いわゆるsimpleなシンプソン法による，完全楕円積分E及びKの計算結果（VIP-BASIC，倍精度計算の結果が単精度表示される。以下も同じ）を，Tables 1及び２の上半分に示した。これを見ると，計算の限界に近い$N=16000$分割にしてもまだ，真値（9）との一致（影を付けた部分）が不充分なことが明らかである。本検討の最終目標は，ホスト・ゲスト包接錯体のシミュレーションであり，そこでは実用的な近似計算を繰り返し使用する必要がある。このままでは，完全楕円積分の近似計算自体が肥大化してしまうので好ましくないと判断し，一旦中断した。

Table 1. Calculation of Complete Elliptic Integral *E* with use of *Simple* and *Converged* Simpson Methods

	N \ k^2	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
	2	1.22400	1.10612	1.08778	1.06892	1.04949	1.02944	1.00870	0.987173	0.964755	0.941312	0.916667
	4	1.25549	1.23136	1.20644	1.18064	1.15383	1.12586	1.09654	1.06561	1.03269	0.997234	0.958333
	8	1.34806	1.31936	1.28961	1.25869	1.22640	1.19251	1.15670	1.11851	1.07723	1.03164	0.979167
	16	1.41338	1.38138	1.34816	1.31354	1.27729	1.23911	1.19856	1.15504	1.10751	1.05406	0.989583
	32	1.45951	1.42517	1.38947	1.35222	1.31313	1.27187	1.22794	1.18057	1.12852	1.06926	0.994792
S	64	1.49212	1.45611	1.41865	1.37952	1.33843	1.29498	1.24863	1.19852	1.14323	1.07978	0.997396
i	128	1.51516	1.47798	1.43927	1.39881	1.35629	1.31130	1.26323	1.21118	1.15359	1.08714	0.998698
m	256	1.53146	1.49344	1.45385	1.41245	1.36892	1.32283	1.27354	1.22012	1.16089	1.09232	0.999349
p	512	1.54298	1.50437	1.46416	1.42209	1.37785	1.33097	1.28083	1.22643	1.16605	1.09597	0.999674
l	1024	1.55113	1.51210	1.47144	1.42891	1.38416	1.33674	1.28599	1.23090	1.16969	1.09855	0.999837
e	2048	1.55689	1.51756	1.47660	1.43373	1.38862	1.34081	1.28963	1.23405	1.17227	1.10038	0.999919
	4000	1.56085	1.52132	1.48013	1.43704	1.39168	1.34361	1.29213	1.23622	1.17404	1.10163	0.999958
	4096	1.56096	1.52143	1.48024	1.43714	1.39177	1.34369	1.29221	1.23628	1.17409	1.10166	0.999959
	8000	1.56376	1.52408	1.48274	1.43948	1.39394	1.34567	1.29398	1.23782	1.17534	1.10255	0.999979
	8192	1.56384	1.52416	1.48282	1.43955	1.39401	1.34573	1.29403	1.23786	1.17538	1.10258	0.999980
	16000	1.56582	1.52604	1.48458	1.44120	1.39554	1.34713	1.29528	1.23895	1.17626	1.10320	0.999990
	∞ (Real Values)	1.57080	1.53075	1.48903	1.44536	1.39939	1.35064	1.29842	1.24167	1.17848	1.10477	1.00000
	16000, 8000, 4000	1.57080	1.53076	1.48904	1.44536	1.39939	1.35064	1.29843	1.24167	1.17849	1.10477	1.00000
C	8192, 4096, 2048	1.57080	1.53076	1.48903	1.44536	1.39939	1.35064	1.29843	1.24167	1.17849	1.10477	1.00000
o	4096, 2048, 1024	1.57080	1.53076	1.48903	1.44536	1.39939	1.35064	1.29843	1.24167	1.17849	1.10477	1.00000
n	2048, 1024, 512	1.57080	1.53076	1.48903	1.44536	1.39939	1.35064	1.29843	1.24167	1.17849	1.10477	1.00000
v	1024, 512, 256	1.57079	1.53076	1.48903	1.44536	1.39939	1.35064	1.29842	1.24166	1.17848	1.10475	1.00000
e	512, 256, 128	1.57079	1.53075	1.48903	1.44535	1.39938	1.35063	1.29841	1.24164	1.17845	1.10472	1.00000
r	256, 128, 64	1.57078	1.53074	1.48901	1.44533	1.39935	1.35059	1.29836	1.24159	1.17838	1.10461	1.00000
g	128, 64, 32	1.57076	1.53070	1.48896	1.44527	1.39928	1.35050	1.29825	1.24144	1.17818	1.10430	1.00000
e	64, 32, 16	1.57068	1.53060	1.48883	1.44510	1.39907	1.35024	1.29792	1.24102	1.17762	1.10346	1.00000
d	32, 16, 8	1.57047	1.53031	1.48846	1.44463	1.39847	1.34950	1.29700	1.23985	1.17606	1.10121	1.00000
	16, 8, 4	1.56990	1.52952	1.48741	1.44330	1.39681	1.34743	1.29442	1.23660	1.17188	1.09603	1.00000
	8, 4, 2	1.56830	1.52731	1.48451	1.43960	1.39219	1.34172	1.28741	1.22809	1.16201	1.08666	1.00000

Table 2. Calculation of Complete Elliptic Integral K with use of *Simple* and *Converged* Simpson Methods (Part 1)

	N \ k^2	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	0.99	1.0
Simple	2	1.12400	1.14233	1.16216	1.18372	1.20730	1.23328	1.26213	1.29450	1.33124	1.37351	1.41768	∞
	4	1.25549	1.28038	1.30782	1.33835	1.37271	1.41191	1.45744	1.51153	1.57786	1.66294	1.76620	∞
	8	1.34806	1.37776	1.41085	1.44813	1.49075	1.54037	1.59959	1.67272	1.76783	1.90281	2.10077	∞
	16	1.41338	1.44654	1.48371	1.52590	1.57457	1.63190	1.70143	1.78934	1.90816	2.09012	2.41688	∞
	32	1.45951	1.49515	1.53524	1.58094	1.63395	1.69685	1.77388	1.87267	2.00939	2.22952	2.70518	∞
	64	1.49212	1.52951	1.57167	1.61987	1.67598	1.74286	1.82526	1.93188	2.08163	2.33044	2.95396	∞
	128	1.51516	1.55380	1.59743	1.64740	1.70571	1.77542	1.86164	1.97385	2.13294	2.40257	3.15476	∞
	256	1.53146	1.57098	1.61565	1.66688	1.72674	1.79845	1.88738	2.00357	2.16929	2.45384	3.30748	∞
	512	1.54298	1.58312	1.62853	1.68065	1.74161	1.81474	1.90559	2.02459	2.19503	2.49018	3.41928	∞
	1024	1.55113	1.59171	1.63763	1.69038	1.75213	1.82626	1.91847	2.03946	2.21323	2.51592	3.49958	∞
	2048	1.55689	1.59778	1.64408	1.69727	1.75957	1.83441	1.92758	2.04997	2.22611	2.53412	3.55678	∞
	4000	1.56085	1.60195	1.64850	1.70200	1.76467	1.84000	1.93383	2.05720	2.23495	2.54663	3.59621	∞
	4096	1.56096	1.60208	1.64863	1.70214	1.76482	1.84017	1.93402	2.05741	2.23522	2.54700	3.59738	∞
	8000	1.56376	1.60502	1.65176	1.70548	1.76844	1.84412	1.93844	2.06252	2.24147	2.55584	3.62530	∞
	8192	1.56384	1.60511	1.65185	1.70558	1.76854	1.84424	1.93857	2.06267	2.24166	2.55610	3.62613	∞
	16000	1.56582	1.60720	1.65406	1.70794	1.77110	1.84704	1.94170	2.06628	2.24608	2.56236	3.64589	∞
	∞ (Real Values)	1.57080	1.61244	1.65962	1.71388	1.77751	1.85407	1.94956	2.07536	2.25720	2.57809	3.69563	∞
Converged	16000, 8000, 4000	1.57080	1.61244	1.65962	1.71389	1.77752	1.85407	1.94957	2.07536	2.25721	2.57810	3.69575	∞
	8192, 4096, 2048	1.57080	1.61244	1.65962	1.71389	1.77752	1.85408	1.94957	2.07536	2.25721	2.57810	3.69596	∞
	4096, 2048, 1024	1.57080	1.61244	1.65962	1.71389	1.77752	1.85408	1.94957	2.07537	2.25721	2.57812	3.69657	∞
	2048, 1024, 512	1.57080	1.61244	1.65962	1.71389	1.77752	1.85408	1.94957	2.07537	2.25723	2.57816	3.69842	∞
	1024, 512, 256	1.57079	1.61244	1.65962	1.71389	1.77752	1.85408	1.94958	2.07539	2.25727	2.57830	3.70437	∞
	512, 256, 128	1.57079	1.61244	1.65962	1.71389	1.77753	1.85410	1.94961	2.07544	2.25738	2.57868	3.72466	∞
	256, 128, 64	1.57078	1.61243	1.65962	1.71390	1.77755	1.85414	1.94968	2.07559	2.25771	2.57981	3.79253	∞
	128, 64, 32	1.57076	1.61242	1.65962	1.71392	1.77761	1.85425	1.94990	2.07601	2.25867	2.58335	3.99527	∞
	64, 32, 16	1.57068	1.61237	1.65963	1.71399	1.77778	1.85458	1.95053	2.07727	2.26165	2.59515	4.51991	∞
	32, 16, 8	1.57047	1.61226	1.65963	1.71419	1.77827	1.85558	1.95247	2.08125	2.27152	2.63511	5.69426	∞
	16, 8, 4	1.56990	1.61193	1.65968	1.71480	1.77981	1.85873	1.95874	2.09455	2.30473	2.75745	7.82975	∞
	8, 4, 2	1.55830	1.61106	1.65992	1.71685	1.78489	1.86926	1.97975	2.13798	2.40501	3.06413	10.1223	∞

この問題の解決の鍵は，意外な所から得られた。実用に耐える近似計算の先駆的なものは，言うまでもなく円周率（π）に関するものである。級数展開式が得られる以前の時代には，円を正多角形で近似してその周を計算していたが，太陰太陽暦の計算のためには，円周率の有効数字が１０ケタ近くも必要であったから，如何にしてより少ない労力で円周率の近似値の精度を上げるかが問題となっていた。和算で著名な関孝和が生み出した「増約術」と呼ばれる方法は，或る数列を等比級数として扱うことが可能である場合の級数の，極限値を推算するのに用いられる方法（本論文では「極限収斂操作」と呼ぶことにする）である。因みに孝和は，この方法により，円に内接する３つの正多角形の周（３２７６８，６５５３６，及び１３１０７２角形）の，円周率の真値と各々８ないし９ケタしか密合していない数値を元にして，真値と１７ケタ密合する近似値を導き出すのに成功した（１０）。

即ち，連続する３個の数列の値をa_1, a_2, a_3（a_2とa_3の差の絶対値はa_1とa_2の差の絶対値より小さい），極限値をa_∞とした時，それは式［５］で与えられる。

$$a_\infty = a_2 + \frac{(a_2 - a_1)(a_3 - a_2)}{(a_2 - a_1) - (a_3 - a_2)} \qquad [5]$$

Tables １及び２の上半分の結果より，シンプソン法での区間分割数Nを倍々にしていった時に得られた完全楕円積分の計算値の「増し分」は，明らかに，先へ行くに従って小さくなっていっている。このことから，これらの計算値が順番に等比級数を成すものと仮定して扱うことが可能ではないかと考え，次のような検討を行った。即ち，N，２N，及び４N分割で得られた近似値に対して順次，式［５］を適用して極限推定値を求めた。Tables １及び２の下半分に示したのがそれである。結果は，極限収斂操作１回の適用によって近似計算値の真値への密合が非常に早くなり，$N \geq 256$の条件下では，完全楕円積分の近似計算で，Eの全領域と，Kの$k^2 \leq 0.9$の領域とで，既知の積分値（９）と非常に良い一致を示すことが明らかとなった。但し，完全楕円積分Kの$k^2 > 0.9$の領域についてはこのままでは不充分なので，更に詳細な検討を行った。

即ち，極限収斂操作１回（C = Convergedの意）を行って得られた，連続する近似計算値３個に対して，もう１回極限収斂操作を行ったもの（DC = Doubly Convergedの意）の結果をTable ３に示した（カゲを付けた部分が真値との一致を示す）。その結果，最初のシンプソン法に於ける区間分割数がN＝１０００，２０００，４０００，８０００，１６０００の場合には，$k^2 = 0.99$まで，ダブル極限収斂操作を行って得られた完全楕円積分Kの計算結果が，真値に問題なく密合することが認められた。一方，区間分割数N＝１００，２００，４００，８００，１６００の場合の結果はこれよりやや落ちるが，それでも，$k^2 = 0.96$まで密合の低下を示していないことが明らかとなった。

以上より，完全楕円積分の近似計算で，Eの全領域とKの$k^2 \leq 0.9$の領域についてはN＝１００，２００，４００，８００，１６００による<u>シングル極限収斂操作付き</u>シンプソン法，Kの$k^2 > 0.9$の領域についてはN＝１０００，２０００，４０００，８０００，１６０００による<u>ダブル極限収斂操作付き</u>シンプソン法を用いれば10^{-5}以下の誤差でおさまることが明らかになった（完全楕円積分Kの$k^2 = 0.999$に於ける本法による計算結果は，真値と若干食い違ってきているが，Johnson-Bovey 式から見る

Table 3. Cauculation of Complete Elliptic Integral K with use of *Simple* and *Converged* Simpson Methods (Part 2)

Mode*	N \ k^2	0.90	0.91	0.92	0.93	0.94	0.95	0.96	0.97	0.98	0.99	0.999
S	100	2.37964	2.41866	2.46186	2.51022	2.56513	2.62863	2.70393	2.79647	2.91666	3.08895	3.35496
S	200	2.43756	2.47967	2.52650	2.57923	2.63953	2.70993	2.79447	2.90030	3.04203	3.25826	3.66098
S	400	2.47865	2.52296	2.57240	2.62826	2.69245	2.76782	2.85908	2.97467	3.13252	3.38356	3.93657
S	800	2.50775	2.55363	2.60492	2.66302	2.72997	2.80890	2.90496	3.02757	3.19711	3.47403	4.16990
S	1600	2.52835	2.57534	2.62794	2.68762	2.75654	2.83800	2.93748	3.06509	3.24299	3.53861	4.35456
C	400, 200, 100 (I)	2.57895	2.62880	2.68480	2.74863	2.82277	2.91107	3.02010	3.16237	3.36727	3.74041	6.43361
C	800, 400, 200 (II)	2.57839	2.62813	2.68398	2.74761	2.82144	2.90926	3.01743	3.15798	3.35824	3.70896	5.45766
C	1600, 800, 400 (III)	2.57820	2.62790	2.68370	2.74726	2.82099	2.90865	3.01656	3.15659	3.35550	3.69979	5.05527
DC	I, II, III	2.57810	2.62778	2.68356	2.74708	2.82076	2.90836	3.01615	3.15594	3.35430	3.69602	4.77296
S	1000	2.51517	2.56145	2.61321	2.67188	2.73954	2.81939	2.91668	3.04109	3.21363	3.49726	4.23471
S	2000	2.53360	2.58087	2.63381	2.69389	2.76331	2.84542	2.94577	3.07467	3.25471	3.55513	4.40384
S	4000	2.54663	2.59461	2.64837	2.70947	2.78013	2.86384	2.96637	3.09844	3.28380	3.59621	4.52908
S	8000	2.55584	2.60432	2.65867	2.72048	2.79203	2.87687	2.98093	3.11526	3.30440	3.62530	4.61953
S	16000	2.56236	2.61119	2.66596	2.72827	2.80044	2.88609	2.99124	3.12715	3.31896	3.64589	4.68411
C	4000, 2000, 1000 (IV)	2.57812	2.62780	2.68359	2.74712	2.82081	2.90842	3.01622	3.15605	3.35447	3.69661	4.88652
C	8000, 4000, 2000 (V)	2.57810	2.62778	2.68356	2.74709	2.82077	2.90837	3.01615	3.15594	3.35426	3.69597	4.85463
C	16000, 8000, 4000 (VI)	2.57810	2.62778	2.68356	2.74708	2.82076	2.90835	3.01613	3.15590	3.35418	3.69575	4.84534
DC	IV, V, VI	2.57809	2.62777	2.68355	2.74707	2.82075	2.90834	3.01611	3.15588	3.35414	3.69564	4.84152
	∞ (Real Values)	2.57809	2.62777	2.68355	2.74707	2.82075	2.90833	3.01611	3.15587	3.35414	3.69563	4.84113

(*) S, Simple; C, Converged; DC, Doubly-Converged.

と，$k^2=1$ の地点はベンゼン環の縁に当たっており，van der Waals 半径を侵さない限り，ホスト・ゲスト包接錯体の研究にあっては少なくとも，考慮する必要の無い場所である）。これらの成果を実用に供するため，以上２種類の新規シンプソン法を反映したプログラム，ＥＳＺ１６００及びＫＳＺ１６００（VIP-BASIC）を作成した（Appendix １及び２を参照）。

次に，何故極限収斂操作を（場合によっては２回）行うと，近似計算値の真値への密合が格段に向上するのかを考察する。いま，積分区間を０から x までとした場合の楕円積分 $K(k, x)$ を式［6］のように定義する。

$$K(k,x)=\int_0^x \frac{1}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}}\,dt = x+\frac{1+k^2}{2\times 3}x^3+\frac{3+2k^2+3k^4}{8\times 5}x^5 + \frac{5+3k^2+3k^4+5k^6}{16\times 7}x^7+\frac{35+20k^2+18k^4+20k^6+35k^8}{128\times 9}x^9+\cdots \quad [6]$$

ここで，$x=1-1/N$ 及び $1-1/2N$ とした場合の K の差を取り，N の降べきの順に整理すると式［7］が得られる。

$$\begin{aligned}
&K\left(k,\left(1-\frac{1}{N}\right)\right)-K\left(k,\left(1-\frac{1}{2N}\right)\right)=\\
&\frac{1}{N}\left[\frac{1}{2}+\frac{1}{4}(1+k^2)+\frac{1}{16}(3+2k^2+3k^4)+\frac{1}{32}(5+3k^2+3k^4+5k^6)\right.\\
&\qquad\left.+\frac{1}{256}(35+20k^2+18k^4+20k^6+35k^8)+\cdots\right]\\
&-\frac{1}{N^2}\left[\frac{3}{8}(1+k^2)+\frac{3}{16}(3+2k^2+3k^4)+\frac{9}{64}(5+3k^2+3k^4+5k^6)\right.\\
&\qquad\left.+\frac{3}{128}(35+20k^2+18k^4+20k^6+35k^8)+\cdots\right]\\
&+\frac{1}{N^3}\left[\frac{7}{48}(1+k^2)+\frac{7}{32}(3+2k^2+3k^4)+\frac{35}{128}(5+3k^2+3k^4+5k^6)\right.\\
&\qquad\left.+\frac{49}{768}(35+20k^2+18k^4+20k^6+35k^8)+\cdots\right]\\
&-\frac{1}{N^4}\left[\frac{15}{128}(3+2k^2+3k^4)+\frac{525}{1792}(5+3k^2+3k^4+5k^6)\right.\\
&\qquad\left.+\frac{105}{1024}(35+20k^2+18k^4+20k^6+35k^8)+\cdots\right]+\cdots \quad [7]
\end{aligned}$$

前にも述べた通り，式［５］よる極限収斂操作は，$K(k, x)$ の値の「数列の差」が等比級数を成す場合に限り適用可能である。従って，$1/N$ の項のみが利いているのであれば，N を倍々に変えていくという条件下では，k^2 の値の如何にかかわらずこの

条件は明らかに成立するので，１回の操作だけで真値へ密合してしまうはずであるが，k^2が１に近い場合には外れてくる。それは，１／N^2以下のべき項が単精度表示のケタ数の範囲内で無視出来ない大きさになるためである。具体的には，式［７］に於いて，$k=1$と置いた時の（$1+k^2$）を含む項の値は，順に１／２，３／４，７／２４，０，また，（$3+2k^2+3k^4$）を含む項の値は順に１／２，３／２，７／４，１５／１６となり，１／N^2の係数の方が明らかに大きくなっていることがわかる。N～１０００程度の計算では，当然，10^{-3}のオーダーで利いてくる水準である。

極限収斂操作は，要するに，収斂可能な部分から定数化する操作であるから，収斂可能でない部分は最大でN倍に増幅される可能性がある。即ち，式［７］で１／N^2の項は１回操作後は１／Nのオーダーとなり，２回操作後に定数化，という過程をたどることになる故，一般に，１／N^n項の定数化までにはn回の操作が必要なはずである。今回の検討で結果的に，予測よりも１回少ない２回の操作でＯＫとなったのは，この時点で，最初の１／N^3項の影響がたまたま，単精度表示のケタ数の範囲内に及ばなくなったからに過ぎない。有効数字のやたらと多い近似値を研究上必要としていない筆者の，幸運と言うべきである。

３．結論

筆者は，ホスト・ゲスト包接錯体のシミュレーションに当たり，ベンゼン環まわりの磁気異方性効果を半定量的に評価する必要から，完全楕円積分E及びKの実用的な近似値をなるべく簡単に得る方法を検討した。その結果，極限収斂操作付きシンプソン法を見出し，これにより，ほぼ全領域に亙り，真値との誤差を10^{-5}以下に抑えることに成功した。本法には数学的に解決していない部分が若干残っているが，実際の計算上からは何の問題もなく，本題の磁気異方性効果の研究を進めるための強力な武器が得られたと考えている。計算プログラム・ＥＳＺ１６００とＫＳＺ１６００に集約される本研究の成果の更なる応用については，現在進行中である。

４．実験の部

プログラム（ＥＳＺ１６００，ＫＳＺ１６００）は，VIP-BASIC (Mainstay 社製，ver. 1.0.3) を使用して作成した（Appendix １及び２）。演算は，PowerPC 8100/80AV（Macintosh 社製）を用いて行った。現段階での演算時間は，シンプソン法での区間分割数Nの最大が１６００の場合約７秒，１６０００の場合約７０秒である。Dimension の制約があり，これを極力，区間分割数Nのために確保する必要から，サブルーチン使用等によりプログラムを見易く整理することは行っていない。

References and Notes

(1) I. Takahashi, A. Nomura, and H. Kitajima, *Chem. Express*, **8**, 593-596 (1993).

(2) 高橋一朗，北嶋英彦，*福井大学工学部研究報告*，**42**, 143-156 (1994)，及び，引用文献。

(3) C. E. Johnson, Jr. and F. A. Bovey, *J. Chem. Phys.*, **29**, 1012-1014 (1958).

(4) 日本数学会編，「岩波 数学辞典 第2版」，岩波書店，１９６８年，ｐ．７７－７８，及び，ｐ．９２８。

(5) 例えば： 春日屋伸昌編，「新編 数値表」，学献社，１９６８年。

(6) 林 桂一，「数値計算」，岩波書店，１９４１年，ｐ．３２６－３３１。

(7) 玉虫文一，富山小太郎，小谷正雄，安藤鋭郎，高橋秀俊，久保亮五，長倉三郎，井上 敏編，「岩波 理化学辞典 第3版」，岩波書店，１９７１年，ｐ．６６８。

(8) 文献６，ｐ．２８０。

(9) 文献３，ｐ．９７３－９７４； 文献５，ｐ．９１－９６。

(10) 平山 諦 「改訂新版 円周率の歴史」，大阪教育図書，１９８０年，第６章。

```
1   CALL _dispatch_setup

    '*****************************************
    '*                                       *
    '*   CALCULATION OF ELLIPTIC INTEGRAL E  *
    '*                                       *
    '*****************************************

    N1=1600
    N2=800
    N3=400
    N4=200
    N5=100

    INPUT "VALUE OF K2=";K2

    T1=2*N1
    T2=2*N2
    T3=2*N3
    T4=2*N4
    T5=2*N5

    DIM E(T1+1)

2   FOR L=1 TO T1
3      C2=SQR(1.0-((L-1)/T1)^2.0)
       M2=SQR(1.0-K2*((L-1)/T1)^2.0)
       E(L)=M2/C2
    NEXT L
4   SE0=E(1)
    SE1=0.0
5   FOR M=1 TO N1
6      SE1=SE1+E(M*2)
    NEXT M
7   SE2=0.0
8   FOR M=1 TO N1-1
9      SE2=SE2+E(M*2+1)
    NEXT M
10  DE1=(SE0+SE1*4.0+SE2*2.0)/(T1*3.0)

11  FOR L=1 TO T2
12     C2=SQR(1.0-((L-1)/T2)^2.0)
       M2=SQR(1.0-K2*((L-1)/T2)^2.0)
       E(L)=M2/C2
    NEXT L
13  SE0=E(1)
    SE1=0.0
14  FOR M=1 TO N2
15     SE1=SE1+E(M*2)
    NEXT M
16  SE2=0.0
17  FOR M=1 TO N2-1
18     SE2=SE2+E(M*2+1)
    NEXT M
19  DE2=(SE0+SE1*4.0+SE2*2.0)/(T2*3.0)

20  FOR L=1 TO T3
21     C2=SQR(1.0-((L-1)/T3)^2.0)
       M2=SQR(1.0-K2*((L-1)/T3)^2.0)
       E(L)=M2/C2
    NEXT L
22  SE0=E(1)
    SE1=0.0
23  FOR M=1 TO N3
24     SE1=SE1+E(M*2)
    NEXT M
25  SE2=0.0
26  FOR M=1 TO N3-1
27     SE2=SE2+E(M*2+1)
    NEXT M
28  DE3=(SE0+SE1*4.0+SE2*2.0)/(T3*3.0)

29  FOR L=1 TO T4
30     C2=SQR(1.0-((L-1)/T4)^2.0)
       M2=SQR(1.0-K2*((L-1)/T4)^2.0)
       E(L)=M2/C2
    NEXT L
31  SE0=E(1)
    SE1=0.0
32  FOR M=1 TO N4
33     SE1=SE1+E(M*2)
    NEXT M
34  SE2=0.0
35  FOR M=1 TO N4-1
36     SE2=SE2+E(M*2+1)
    NEXT M
37  DE4=(SE0+SE1*4.0+SE2*2.0)/(T4*3.0)

38  FOR L=1 TO T5
39     C2=SQR(1.0-((L-1)/T5)^2.0)
       M2=SQR(1.0-K2*((L-1)/T5)^2.0)
       E(L)=M2/C2
    NEXT L
40  SE0=E(1)
    SE1=0.0
41  FOR M=1 TO N5
42     SE1=SE1+E(M*2)
    NEXT M
43  SE2=0.0
44  FOR M=1 TO N5-1
45     SE2=SE2+E(M*2+1)
    NEXT M
46  DE5=(SE0+SE1*4.0+SE2*2.0)/(T5*3.0)

    DEZ1=1.0/((1.0/(DE1-DE2))-(1.0/(DE2-DE3)))+DE2
    DEZ2=1.0/((1.0/(DE2-DE3))-(1.0/(DE3-DE4)))+DE3
    DEZ3=1.0/((1.0/(DE3-DE4))-(1.0/(DE4-DE5)))+DE4
    DEZZ=1.0/((1.0/(DEZ1-DEZ2))-(1.0/(DEZ2-DEZ3)))+DEZ2

    LPRINT:LPRINT "K2=";K2;:LPRINT
    LPRINT:LPRINT "DEZ1=";DEZ1;:LPRINT
    LPRINT:LPRINT "DEZ2=";DEZ2;:LPRINT
    LPRINT:LPRINT "DEZ3=";DEZ3;:LPRINT
    LPRINT:LPRINT "DEZZ=";DEZZ;:LPRINT
    END
```

Appendix 2 (KSZ1600)

```
1       CALL _dispatch_setup
        '***************************************
        '*                                     *
        '*   CALCULATION OF ELLIPTIC INTEGRAL K  *
        '*                                     *
        '***************************************

        N1=1600
        N2=800
        N3=400
        N4=200
        N5=100

        INPUT "VALUE OF K2 =";K2

2       IF K2<=0.9 THEN
3          N1=N1
           N2=N2
           N3=N3
           N4=N4
           N5=N5
4          GOTO 1
        ELSE
5          N1=10*N1
           N2=10*N2
           N3=10*N3
           N4=10*N4
           N5=10*N5

6       1  T1=2*N1
           T2=2*N2
           T3=2*N3
           T4=2*N4
           T5=2*N5

           DIM K(T1+1)

7          FOR L=1 TO T1
8             C2=SQR(1.0-((L-1)/T1)^2.0)
              M2=SQR(1.0-K2*((L-1)/T1)^2.0)
              K(L)=1.0/(C2*M2)
           NEXT L
9          SK0=K(1)
           SK1=0.0
10         FOR M=1 TO N1
11            SK1=SK1+K(M*2)
           NEXT M
12         SK2=0.0
13         FOR M=1 TO N1-1
14            SK2=SK2+K(M*2+1)
           NEXT M
15         DK1=(SK0+SK1*4.0+SK2*2.0)/(T1*3)

16         FOR L=1 TO T2
17            C2=SQR(1.0-((L-1)/T2)^2.0)
              M2=SQR(1.0-K2*((L-1)/T2)^2.0)
              K(L)=1.0/(C2*M2)
           NEXT L
18         SK0=K(1)
           SK1=0.0
19         FOR M=1 TO N2
20            SK1=SK1+K(M*2)
           NEXT M
21         SK2=0.0
22         FOR M=1 TO N2-1
23            SK2=SK2+K(M*2+1)
           NEXT M
24         DK2=(SK0+SK1*4.0+SK2*2.0)/(T2*3)

25         FOR L=1 TO T3
26            C2=SQR(1.0-((L-1)/T3)^2.0)
              M2=SQR(1.0-K2*((L-1)/T3)^2.0)
              K(L)=1.0/(C2*M2)
           NEXT L
27         SK0=K(1)
           SK1=0.0
28         FOR M=1 TO N3
29            SK1=SK1+K(M*2)
           NEXT M
30         SK2=0.0
31         FOR M=1 TO N3-1
32            SK2=SK2+K(M*2+1)
           NEXT M
33         DK3=(SK0+SK1*4.0+SK2*2.0)/(T3*3)

34         FOR L=1 TO T4
35            C2=SQR(1.0-((L-1)/T4)^2.0)
              M2=SQR(1.0-K2*((L-1)/T4)^2.0)
              K(L)=1.0/(C2*M2)
           NEXT L
36         SK0=K(1)
           SK1=0.0
37         FOR M=1 TO N4
38            SK1=SK1+K(M*2)
           NEXT M
39         SK2=0.0
40         FOR M=1 TO N4-1
41            SK2=SK2+K(M*2+1)
           NEXT M
42         DK4=(SK0+SK1*4.0+SK2*2.0)/(T4*3)

43         FOR L=1 TO T5
44            C2=SQR(1.0-((L-1)/T5)^2.0)
              M2=SQR(1.0-K2*((L-1)/T5)^2.0)
              K(L)=1.0/(C2*M2)
           NEXT L
45         SK0=K(1)
           SK1=0.0
46         FOR M=1 TO N5
47            SK1=SK1+K(M*2)
           NEXT M
48         SK2=0.0
49         FOR M=1 TO N5-1
50            SK2=SK2+K(M*2+1)
           NEXT M
51         DK5=(SK0+SK1*4.0+SK2*2.0)/(T5*3)

           DKZ1=1.0/((1.0/(DK1-DK2))-(1.0/(DK2-DK3)))+DK2
           DKZ2=1.0/((1.0/(DK2-DK3))-(1.0/(DK3-DK4)))+DK3
           DKZ3=1.0/((1.0/(DK3-DK4))-(1.0/(DK4-DK5)))+DK4
           DKZZ=1.0/((1.0/(DKZ1-DKZ2))-(1.0/(DKZ2-DKZ3)))+DKZ2

           LPRINT:LPRINT "K2=";K2;:LPRINT
           LPRINT:LPRINT "DKZ1=";DKZ1;:LPRINT
           LPRINT:LPRINT "DKZ2=";DKZ2;:LPRINT
           LPRINT:LPRINT "DKZ3=";DKZ3;:LPRINT
           LPRINT:LPRINT "DKZZ=";DKZZ;:LPRINT
           END
```